

不同电压下的固体氧化物电解堆共电解制 合成气多物理场耦合模拟数据集

崔天成¹ 熊 威^{1,2} 李泽明^{1,2} 孙 亚¹ 李 智³ 肖国萍^{1,2}

1(中国科学院上海应用物理研究所 上海 201800)

2(中国科学院大学 北京 100049)

3(山东能源集团有限公司 大型煤气化及煤基新材料国家工程研究中心 济南 250000)

摘要 固体氧化物共电解制合成气技术具有高效、氢碳比灵活可调等诸多优势,可实现高效低成本的合成气规模化制备。基于 COMSOL 软件针对 6 片组成的固体氧化物电解堆开展多物理场耦合共电解数值模拟,电解堆气体入口温度为 700 °C,电解堆阴极侧进气组分比例(水蒸气:二氧化碳:氢气)为 4:4:2,获得了电解堆在 6.0~7.8 V 不同电解电压下的流场、一氧化碳浓度场、二氧化碳浓度场、水蒸气浓度场、氢气浓度场、温度场等分布数据,为后续优化设计高可靠性共电解堆、探究共电解堆失效损伤机理、共电解制合成气系统运行提供重要的数据支撑。

关键词 固体氧化物电解堆, 多物理场模拟, 共电解制合成气

中图分类号 TL99

DOI: 10.3724/j.0253-3219.2026.hjs.49.260178

数据 DOI: 10.57760/sciencedb.hjs.00716

CSTR: 32193.14.hjs.CN31-1342/TL.2026.49.260178

数据 CSTR: 31253.11.sciencedb.hjs.00716

Data set for multi-physics coupling simulation of syngas production *via* co-electrolysis in a solid oxide electrolysis stack under different voltages

CUI Tiancheng¹ XIONG Wei^{1,2} LI Zeming^{1,2} SUN Ya¹ LI Zhi³ XIAO Guoping^{1,2}

1(Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

2(University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

3(National Engineering Research Center of Coal Gasification and Coal - Based Advanced Materials, Shandong Energy Group Co., Ltd., Jinan 250000, China)

Abstract [Background] Co-electrolysis technology based on the solid oxide electrolysis cell for syngas production offers numerous advantages, such as high efficiency and flexibly tunable H₂/CO ratio, enabling large-scale syngas production with high efficiency and low cost. [Purpose] This study aims to collect data set for multi-physics coupling simulation of syngas production applied to improving the gas-thermal uniformity and stability of the stack during co-electrolysis by investigating the multi-physics coupling behavior of the complete electrolysis stack including inlet/outlet gas manifolds in the co-electrolysis process. [Methods] Firstly, based on COMSOL software, a

中国科学院战略性先导科技专项(No.XDA0400000)、国家自然科学基金(No.U24A20542)和山东能源集团科技项目(No.SNKJ2021A12-R03)资助

第一作者: 崔天成, 男, 1992 年出生, 2020 年于浙江大学获博士学位, 研究领域为固体氧化物电池多物理场耦合模拟分析

通信作者: 肖国萍, E-mail: xiaoguoping@sinap.ac.cn

收稿日期: 2026-05-11, 修回日期: 2026-05-29

Supported by Strategic Priority Research Program of Chinese Academy of Sciences (No.XDA0400000), National Natural Science Foundation of China (No.U24A20542) and the Science and Technology Project of Shandong Energy Group (No.SNKJ2021A12-R03)

First author: CUI Tiancheng, male, born in 1992, graduated from Zhejiang University with a doctoral degree in 2020, focusing on multiphysics coupling simulation and analysis of solid oxide cells

Corresponding author: XIAO Guoping, E-mail: xiaoguoping@sinap.ac.cn

Received date: 2026-05-11, revised date: 2026-05-29

multi-physics coupled numerical simulation of co-electrolysis was developed for a six-cell solid oxide electrolysis stack. Then, the gas inlet temperature of the electrolysis stack was set to 700 °C, and the cathode-side inlet gas composition (steam:carbon dioxide:hydrogen) was 4:4:2. Finally, various multi-physics coupling simulation data of syngas production via co-electrolysis in a solid oxide electrolysis stack under different electrolysis voltages were obtained for data set construction. **[Results]** Constructed data set consists of the distribution data of carbon monoxide concentration field, carbon dioxide concentration field, steam concentration field, hydrogen concentration field, and temperature field under different electrolysis voltages ranging from 6.0 V to 7.8 V with interval of 0.6 V. **[Conclusions]** These data obtained in this study provide important support for the subsequent optimization and design of high-reliability co-electrolysis stacks, investigation of failure and damage mechanisms in co-electrolysis stacks, and the operation of co-electrolysis syngas production systems.

Key words Solid oxide electrolysis stack, Multi-physics simulation, Syngas production *via* co-electrolysis

二氧化碳(CO₂)作为最主要的温室气体之一,其持续排放被认为是导致全球变暖和气候系统变化的关键因素。随着我国“双碳”战略目标的提出,实现CO₂减排与资源化利用已成为能源与环境领域的重要研究方向。将CO₂转化为燃料或高附加值化学品被认为是实现碳循环利用和缓解温室效应的有效途径。目前,CO₂转化的主要技术路径包括热化学转化^[1]、光化学转化^[2]、电化学转化^[3]以及生物转化^[4]等。相比其他转换方式,电化学转化技术最具有吸引力,一方面可以通过控制工作电压和催化剂来实现产物调控,另一方面可利用环境友好的可再生能源以及核能实现CO₂的低成本电化学转换。固体氧化物电解池(Solid Oxide Electrolysis Cell, SOEC)是一种高效的电化学转化装置^[5-6],具有电耗低、环保、低成本等诸多优点^[7-8],将其应用在CO₂资源化利用领域还具有转化率高、产物浓度高、分离简单、氢碳比灵活可调等独特优势^[9]。

然而,SOEC共电解制合成气技术规模化应用过程中仍面临许多问题与挑战。在共电解过程中除发生水和二氧化碳电解反应以外,还会发生水汽变换反应、直接内重整反应等多种竞争性反应^[10],这些反应的吸放热特性存在显著差异,易在电解堆内部诱发不均匀的物理场(如温度场、浓度场),进一步导致局部高CO浓度、积碳、高温梯度等问题,加剧电解堆在运行过程中的损伤与性能衰减^[11]。

为解决上述问题,许多学者针对SOEC共电解过程开展了多物理场耦合数值模拟研究。目前,多数共电解模拟研究聚焦于单电池的二维模型与三维模型数值分析^[12-13]。Ni^[10]与Chen等^[13]基于二维稳态模型获得了温度、气体组分、气体压力等工况参数对电解池共电解过程的影响规律。在二维模型的基础上,部分学者又发展了三维电解池共电解多物理场耦合模型^[12,14]。Tu等^[14]开发了椭圆流道电解池模

型用于优化单流道电解池共电解性能,发现椭圆流道比直流道的电解池电流密度与产气效率更高。Cheng等^[15]则构建了扁管式电解池共电解多物理场耦合模型,发现提升工作压力虽然会改善电化学性能,但会导致温度梯度与应力增大。而Liang等^[11]则在数值模拟的基础上进一步融入了试验测试,探究电解池共电解过程中的反应机理与积碳行为,发现燃料侧入口气体含水量和流量会显著影响电解池内部CO₂电解反应与积碳行为。

尽管针对电解池的共电解数值模拟研究已取得了一定的成果,然而与电解池相比,电解堆内部受进出气歧管结构、电池层数、堆叠结构等因素影响,其流场、物质场及温度场的均匀性显著更差^[16]。这一结构特性使电解堆模型的计算复杂度大幅增加,并带来数值计算量大、收敛性差等难题,导致目前针对电解堆共电解过程的多物理场耦合数值模拟研究较为有限。Banerjee等^[17]基于分层多物理场连续介质模型构建了包含10层电池的电解堆模型,研究发现总体效率和合成气产率随着气体停留时间增加而提高,但超过阈值后反应物不足会导致效率下降并增加Ni积炭的可能性。上述研究由于未建立进出气歧管,所以未能考虑进气歧管引起的进气分布不均对电解堆共电解过程的影响规律。因此,为进一步提升电解堆在共电解过程中的气热均匀性与稳定性,迫切需要探究包含进出气歧管的完整电解堆共电解过程多物理场耦合行为。

针对上述问题,本文基于“热-质-化-电”连续介质理论框架,建立了包含6片电池以及进出气歧管的固体氧化物电解堆共电解多物理场耦合数值模型,并进行了网格无关性验证与模型验证,开展了电解堆在6.0~7.8 V不同电解电压和700 °C温度下共电解过程的数值模拟研究,获得电解堆的流场、物质场、温度场等多物理场数据。

1 数值模拟计算方法

基于 COMSOL 有限元软件, 构建包含 6 片 50 mm×50 mm 电池的固体氧化物电解堆共电解多物理场耦合数值模型, 模型具体信息如下。

1.1 电解堆三维模型与材料参数

电解堆三维模型图如图 1 所示, 实心箭头代表阴极侧气体流向, 空心箭头代表空气侧气体流向, 电解堆整体为逆流形式, 气体经进气歧管后分别进入 6 个电池片发生反应, 再由出气歧管排出。电解堆内部 50 mm×50 mm 电池片^[18] 的阳极材料为 $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{CoO}_{3-\delta}(\text{Gd}, \text{Ce})\text{O}_2$ (LSC-CGO), 阳极厚度为 0.015 mm, 电解质材料为氧化钇稳定氧化锆 (Yttria-Stabilized Zirconia, YSZ), 电解质厚度为 0.005 mm, 阴极材料为 Ni-YSZ 金属陶瓷材料, 阴极厚度为 0.478 mm, 气体扩散层材料为镍网, 气体扩散层厚度 0.5 mm, 气体流道高度 1 mm, 气体流道宽度 2 mm, 肋条宽度 1 mm。电解堆 4 个进气歧管的长×宽×高为 10 mm×5 mm×30 mm, 电解堆 2 个出气歧管的长×宽×高为 10 mm×10 mm×30 mm。电解堆材料参数如表 1 所示^[19-21]。

1.2 多物理场耦合数学模型

多物理场耦合模型主要包括电化学反应模型、

化学反应模型、气体流动模型、物质扩散模型和传热模型。为简化数值模型并提高数值收敛性, 本文采用的主要假设如下:

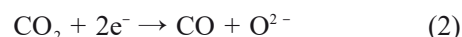
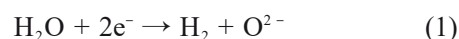
1) 进口气体为充分发展流动且充分混合;

2) 三相界面 (Three Phase Boundary, TPB) 活性位点均匀分布在多孔电极的整个区域, 多孔电极中的离子导电相和电子导电相均为均匀且连续的;

3) 模型中的气体 (CO 、 CO_2 、 H_2O 、 H_2 、 O_2) 均被视为理想气体。

1.2.1 电化学反应模型

阴极侧发生的电解反应如下:



电解产生的 O^{2-} 从阴极通过电解质传递到阳极, 阳极侧 2 mol O^{2-} 释放 4 mol 的电子, 反应如下:



SOEC 的电压可以通过式 (4) 计算得到:

$$V = E_{\text{Nernst}} + \eta_{\text{Act}} + \eta_{\text{conc}} + \eta_{\text{Ohmic}} \quad (4)$$

式中: E_{Nernst} 是 Nernst 电势; η_{Act} 是活化过电势; η_{conc} 是浓度过电势; η_{Ohmic} 是欧姆过电势。

SOEC 的活化过电势代表电极的活性, 使用 Butler-Volmer (B-V) 方程对其求解, 阴极侧的 B-V 方程通过式 (5~6) 计算得到:

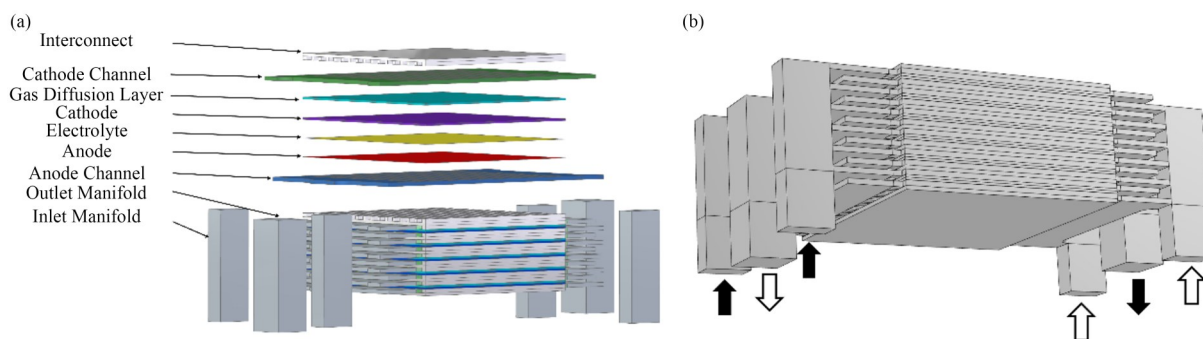


图 1 电解堆三维模型 (彩图见网络版) (a) 电解堆装配示意图, (b) 电解堆整体模型

Fig.1 Three-dimensional model of the electrolysis stack (color online)

(a) Schematic diagram of electrolysis stack assembly, (b) Overall model diagram of electrolysis stack

表 1 电解堆模型材料参数

Table 1 Material parameters of the electrolysis stack model

参数 Parameters	阳极 Anode	电解质 Electrolyte	阴极 Cathode	连接体 Interconnect	气体扩散层 Gas diffusion layer
离子电导率 Ionic conductivity / $\text{S} \cdot \text{m}^{-1}$	—	10	—	—	—
电子电导率 Electronic conductivity / $\Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$	17 000	—	30 300	769 000	850 000
热导率 Thermal conductivity / $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	10	2.7	6.23	27	16
比热容 Specific heat capacity / $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	430	550	450	600	460
孔隙率 Porosity	0.3	—	0.3	—	—

$$i_{c,H_2} = i_{o,H_2,c} \left[\exp \left(\frac{\alpha_a^c n_e F \eta_{act,H_2,c}}{RT} \right) - \exp \left(\frac{-(1 - \alpha_a^c) n_e F \eta_{act,H_2,c}}{RT} \right) \right] \quad (5)$$

$$i_{c,CO} = i_{o,CO,c} \left[\exp \left(\frac{\alpha_a^c n_e F \eta_{act,CO,c}}{RT} \right) - \exp \left(\frac{-(1 - \alpha_a^c) n_e F \eta_{act,CO,c}}{RT} \right) \right] \quad (6)$$

式中: $\alpha_a^c = 0.5$ 是阴极传递系数; F 是法拉第常数; $i_{o,H_2,c}$ 是阴极电解 H_2O 交换电流密度; $i_{o,CO,c}$ 是阴极电解 CO_2 交换电流密度; n_e 是半反应转移电子数; T 是温度; R 是气体常数。

阳极侧的 B-V 方程如式(7):

$$i_a = i_{o,a} \left[\exp \left(\frac{\alpha_a^a n_e F \eta_{act,a}}{RT} \right) - \exp \left(\frac{-(1 - \alpha_a^a) n_e F \eta_{act,a}}{RT} \right) \right] \quad (7)$$

式中: $\alpha_a^a = 0.5$ 是阳极传递系数; $i_{o,a}$ 是阳极交换电流密度。由于受到多孔电极扩散阻抗的影响, 阴极和阳极的 TPB、电极表面、气体流道内所产生的浓度过电位如式(8~10)计算得到:

$$\eta_{conc}^a = \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{X_{O_2,TPB}}{X_{O_2,b}} \right) \quad (8)$$

$$\eta_{conc,H_2}^c = \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{X_{H_2O,b} X_{H_2,TPB}}{X_{H_2O,TPB} X_{H_2,b}} \right) \quad (9)$$

$$\eta_{conc,CO}^c = \frac{RT}{n_e F} \ln \left(\frac{X_{CO_2,b} X_{CO,TPB}}{X_{CO_2,O,TPB} X_{CO,b}} \right) \quad (10)$$

式中: X 代表摩尔分数; 下角标 O_2 、 H_2O 、 H_2 、 CO_2 、 CO 分别代表对应气体组分; 下角标 TPB 和 b 分别代表三相界面和气体流道界面。

根据欧姆定律计算欧姆过电位:

$$\eta_{Ohmic} = IR_{eq,ohm} \quad (11)$$

式中: I 是电流; $R_{eq,ohm}$ 是 SOEC 各部件等效电阻。

电解 H_2O 与电解 CO_2 的热中性电压 V_{th} 分别通过式(12~13)计算得到:

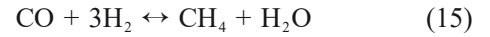
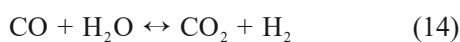
$$V_{th,H_2} = \Delta H_{R,H_2} / n_e F \quad (12)$$

$$V_{th,CO} = \Delta H_{R,CO} / n_e F \quad (13)$$

式中: ΔH_R 是反应焓, 根据反应温度自动计算得到。

1.2.2 化学反应模型

在共电解过程中, 除了电化学反应还会发生水汽变换反应 (Water Gas Shift Reaction, WGSR) 和直接内重整反应 (Direct Internal Reforming, DIR), 分别如式(14~15)所示:



由于直接内重整反应的反应速率极低, 对整个电解过程的物质影响忽略不计, 为降低数值计算量, 在共电解过程中副反应仅考虑水汽变换反应。基于 Haberman 和 Young 的模型计算水汽变换反应速率 R_{WGSR} [10]:

$$R_{WGSR} = k_{sf} \left(p_{H_2O} p_{CO} - \frac{p_{H_2} p_{CO_2}}{K_{ps}} \right) \quad (16)$$

$$k_{sf} = 0.017 \exp \left(\frac{-103191}{RT} \right) \quad (17)$$

$$K_{ps} = \exp \left(-0.2935Z^3 + 0.6351Z^2 + 4.1788Z + 0.3169 \right) \quad (18)$$

$$Z = \frac{1000}{T(K)} - 1 \quad (19)$$

式中: k_{sf} 是正向速率常数, $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{Pa}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$; p 是气体分压。

1.2.3 气体流动模型

气体在多孔电极和气体流道内的流动是同时计算的。基于 Stokes - Brinkman 方程, 同时考虑孔隙率对多孔电极内动量守恒的影响, 控制方程如下:

$$\frac{1}{\varepsilon} \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \frac{\mathbf{u}}{\varepsilon} = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\frac{1}{\varepsilon} \mu (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla) - \frac{2}{3\varepsilon} \mu \nabla \mathbf{u} \right] - \left(\frac{\mu}{k_1} + \frac{S_{mass}}{\varepsilon^2} \right) \mathbf{u} \quad (20)$$

式中: $\mathbf{u}$ 是速度矢量; S_{mass} 是质量源项; ε 是孔隙率; k_1 是比渗透率; ρ 是总气体密度; μ 是气体动态黏度。气体流道内不考虑孔隙率影响的控制方程如下:

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla) - \frac{2}{3} \mu \nabla \mathbf{u} \right] \quad (21)$$

1.2.4 物质扩散模型

多孔电极以及气体流道内的物质扩散计算基于 Fick 扩散定律以及 Knudsen 扩散定律, 具体如下:

$$\mathbf{j}_i = -\rho D_i^{\text{FK}} \nabla \omega_i - \rho \omega_i D_i^{\text{FK}} \frac{\nabla M}{M} + \rho \omega_i \sum_k \frac{M_i}{M} D_k^{\text{f}} \nabla x_k \quad (22)$$

$$M = \left(\sum_i \frac{\omega_i}{M_i} \right)^{-1} \quad (23)$$

$$D_i^{\text{FK}} = \frac{\varepsilon}{\tau} \left(\frac{1}{D_i^{\text{f}}} + \frac{1}{D_i^{\text{K}}} \right)^{-1} \quad (24)$$

式中: $\mathbf{j}_i$ 是 i 物质的质量通量; ω_i 是 i 物质的质量浓度; D_i^{f} 是 i 物质的 Fick 扩散系数; D_i^{K} 是 i 物质的 Knudsen 扩散系数; D_i^{FK} 是 i 物质的总扩散系数; M 是总摩尔质量; τ 是曲折率。

物质传输控制方程如式(25)所示:

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_i + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \omega_i = S_i \quad (25)$$

式中: S_i 是 i 物质的质量源速率。

1.2.5 传热模型

传热控制方程计算如下：

$$\rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T - \nabla (\lambda_{\text{eff}} \nabla T) = Q \quad (26)$$

式中： C_p 是比热容； Q 是热源项； λ_{eff} 是气体和固体的有效导热系数。

热源项仅考虑焦耳热、电化学反应热和化学反应热，计算公式如下：

$$Q = Q_{\text{JH}} + Q_{\text{m1}} + Q_{\text{m2}} \quad (27)$$

式中： Q_{JH} 是焦耳热； Q_{m1} 是电化学反应热； Q_{m2} 是化学反应热。

1.3 数值模拟方法验证

为验证多物理场模型的准确性，使用电解堆模型中的一片电解池模型进行验证。电解池模型设定的边界条件为阴极侧进气流量234标准立方厘米每分钟（Standard Cubic Centimeters per Minute, SCCM），阴极侧进气组分比例为 $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2:\text{H}_2=4:4:2$ ，阳极侧进气流量359SCCM，阳极侧进气为空气，模型阴极与阳极侧气体进口温度为 700°C 。电解池在 700°C 下的电流密度 J -电压 V 曲线模拟结果与试验结果如图2所示。模拟的 J - V 曲线与试验结果较为接近，说明数值模型可以较好地描述电池的电化学性能。

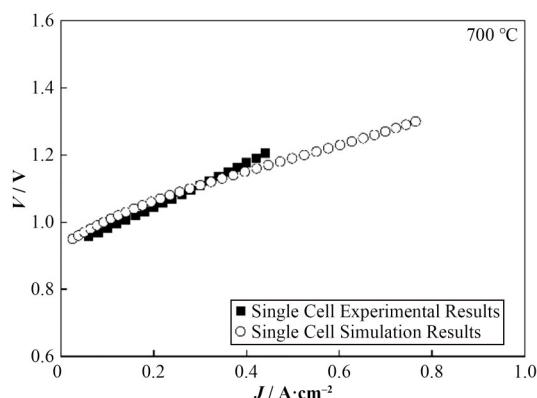


图2 电解池 700°C 下的模拟与试验电流密度-电压曲线
Fig.2 Simulated and experimental current density-voltage (J - V) curves of the electrolysis cell at 700°C

1.4 网格无关性验证

针对电解堆模型进行网格无关性验证，电解堆模型采用六面体结构化网格划分方式，构建了328 958、369 894、413 182三种网格数量的电解堆模型并开展数值计算。电解堆模型网格无关性验证结果如图3所示。从图3中可以看出，三种网格模型在6.00 V和6.12 V电压下的电流密度结果非常接近。因此，为保障模型计算精度并提升模型计算效率，使用网格数量为328 958的模型作为后续数值模拟计

算的网格模型。

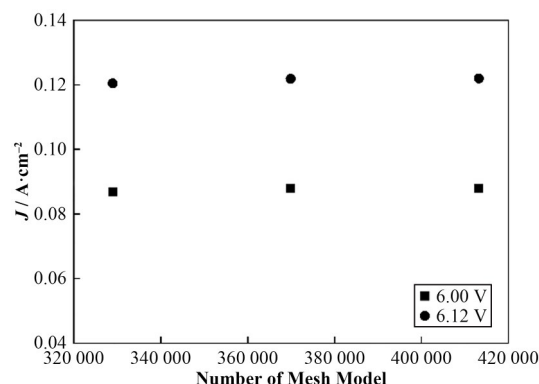


图3 电解堆模型网格无关性验证结果
Fig.3 Verification results of mesh independence of the electrolysis stack model

1.5 网格划分与边界条件

图4为电解堆网格模型，整个模型均采用六面体结构化网格划分方式，电解堆模型网格顶点数418 410，模型六面体单元数量为328 958，模型四边形单元数量为237 916，模型平均单元质量为0.970 7，模型网格体积为83 730 mm^3 。其中进出气歧管部分网格顶点数45 144，进出气歧管部分六面体单元数量为36 400，进出气歧管部分平均单元质量为1.0；6片电池部分网格顶点数373 266，6片电池部分六面体单元数量为292 558，6片电池部分平均单元质量为0.967 1。

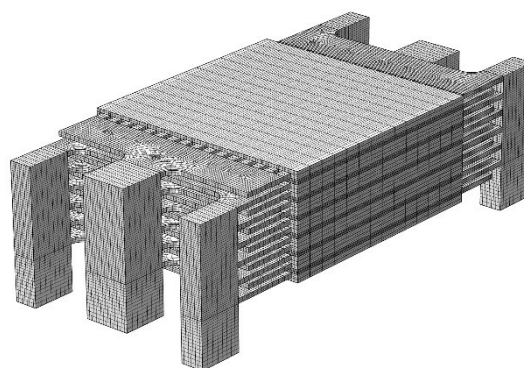


图4 电解堆网格模型示意图
Fig.4 Mesh model diagram of the electrolysis stack

电解堆顶部连接体顶面设为接地，电解堆底部连接体底面设为6.0~7.8 V电势。电解堆阴极侧进气摩尔组分比例（水蒸气：二氧化碳：氢气）为4:4:2，电解堆阳极侧进气摩尔组分比例（氮气：氧气）为79:21。电解堆阴极侧进气流率为 $1.5 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ @ 700°C ，电解堆阳极侧进气流率为 $2.5 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ @ 700°C ，两侧出口压力均为0 Pa且抑制回流。电解堆气体入口温度为 700°C ，电解堆固体表面环境温

度为 720 °C, 电解堆固体表面对流换热系数为 $5 \text{ W} \cdot (\text{m}^2 \cdot \text{K})^{-1}$ 。

2 数值模拟结果描述

2.1 电化学性能

电解堆在 700 °C 下的 J - V 曲线如图 5 所示。图 5 中电解堆在 6.0 V、6.6 V、7.2 V 和 7.8 V 下的电解电流密度分别为 $0.0869 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、 $0.292 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、 $0.585 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、 $0.897 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 。

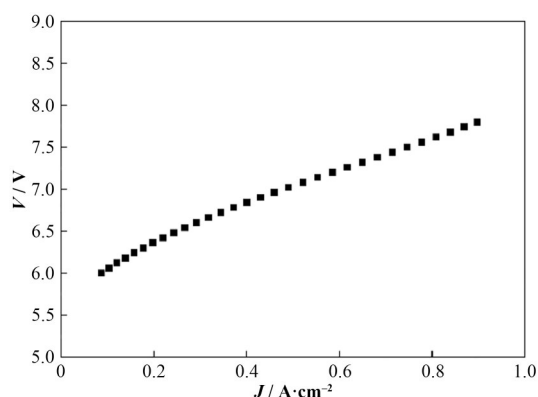


图 5 电解堆在 700 °C 下的 J - V 曲线
Fig.5 Current density-voltage (J - V) curve of the electrolysis stack at 700 °C

2.2 流场分布

不同电压情况下电解堆在阴极侧气体流线如图 6 所示。图 6 结果显示不同电压下电解堆内部的速度场较为接近, 气体均在每层电池出入口附近存在

加速流动现象。电解堆在 6.0 V、6.6 V、7.2 V 和 7.8 V 下出口歧管的平均流速分别为 $1.301 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 、 $1.269 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 、 $1.258 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 、 $1.288 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, 出口流速随着电压的升高呈现先下降再上升的趋势。电解堆在 6.0 V 电压时, 6 层电池各自出口平均速度由下至上分别为 $2.186 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 、 $2.198 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 、 $2.187 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 、 $2.190 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 、 $2.175 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 、 $2.156 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, 电解堆顶部电池的出气量略低于中下部电池的出气量。

2.3 物质场分布

不同电压情况下电解堆阴极侧出口不同气体的摩尔分数 X 如图 7 所示。图 7 中电压低于 6.15 V 时, 出口的 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 高于入口的 $X_{\text{H}_2\text{O}}$, 而当电压超过 6.15 V, 出口的 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 则低于入口的 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 。随着电压升高, 出口的 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 逐渐降低。电压低于 6.15 V 时, 出口的 X_{H_2} 低于入口的 X_{H_2} , 而当电压超过 6.15 V, 出口的 X_{H_2} 则高于入口的 X_{H_2} 。随着电压升高, 出口的 X_{H_2} 逐渐升高。出口的 X_{CO_2} 始终低于入口的 X_{CO_2} , 随着电压升高, 出口的 X_{CO_2} 逐渐降低。随着电压升高, 出口的 X_{CO} 逐渐升高。

不同电压情况下电解堆 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 分布如图 8 所示。图 8(a) 中电解堆在 6.0 V 电压下, 阴极气体流道内的 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 从入口 0.400 至出口逐渐升高至 0.416, 阴极靠近入口侧 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 升高至 0.416, 阴极靠近出口侧 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 则回落至 0.413。图 8(b) 中电解堆在 6.6 V 电压下, 阴极气体流道内的 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 从入口 0.400 至出口逐渐降低至 0.340, 阴极靠近入口侧 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 降低至 0.377, 阴极靠

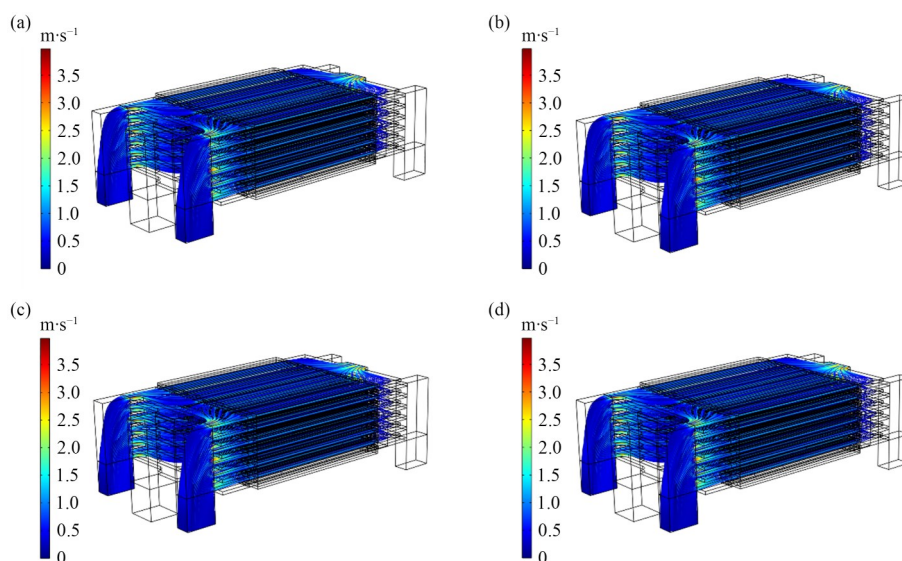


图 6 不同电压情况下电解堆阴极侧气体流线(彩图见网络版) (a) 6.00 V, (b) 6.60 V, (c) 7.20 V, (d) 7.80 V
Fig.6 Gas streamlines on the cathode side of the electrolysis stack under different voltages (color online)
(a) 6.00 V, (b) 6.60 V, (c) 7.20 V, (d) 7.80 V

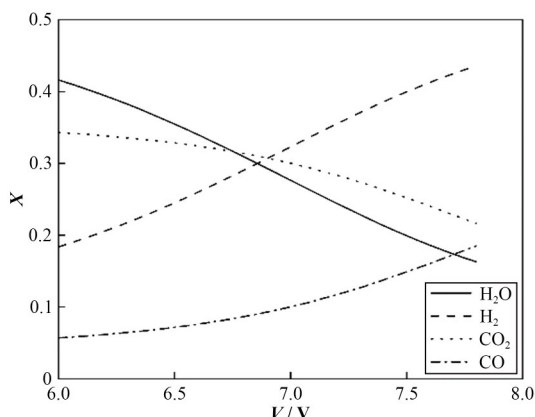


图7 不同电压下电解堆阴极侧出口气体组分

Fig.7 Mole fraction of gas components at the cathode-side outlet of the electrolysis stack under different voltages

近出口侧 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 进一步降低至 0.317。图 8(c) 中电解堆在 7.2 V 电压下, 阴极气体通道内的 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 从入口 0.400 至出口逐渐降低至 0.244, 阴极靠近入口侧 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 降低至 0.333, 阴极靠近出口侧 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 进一步降低至 0.194。图 8(d) 中电解堆在 7.8 V 电压下, 阴极气体通道内的 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 从入口 0.400 至出口逐渐降低至 0.163, 阴极靠近入口侧 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 降低至 0.275, 阴极靠近出口侧 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 进一步降低至 0.091 9。

不同电压情况下电解堆 X_{H_2} 分布如图 9 所示。图 9(a) 中电解堆在 6.0 V 电压下, 阴极气体通道内的 X_{H_2} 从入口 0.200 至出口逐渐下降至 0.184, 阴极靠近入口侧 X_{H_2} 降至 0.198, 阴极靠近出口侧 X_{H_2} 进一步降至 0.185。图 9(b) 中电解堆在 6.6 V 电压下, 阴极气

体通道内的 X_{H_2} 从入口 0.200 至出口逐渐升高至 0.260, 阴极靠近入口侧 X_{H_2} 升至 0.226, 阴极靠近出口侧 X_{H_2} 进一步升至 0.270。图 9(c) 中电解堆在 7.2 V 电压下, 阴极气体通道内的 X_{H_2} 从入口 0.200 至出口逐渐升高至 0.355, 阴极靠近入口侧 X_{H_2} 升至 0.240, 阴极靠近出口侧 X_{H_2} 进一步升至 0.374。图 9(d) 中电解堆在 7.8 V 电压下, 阴极气体通道内的 X_{H_2} 从入口 0.200 至出口逐渐升高至 0.436, 阴极靠近入口侧 X_{H_2} 升至 0.278, 阴极靠近出口侧 X_{H_2} 进一步升至 0.466。

不同电压情况下电解堆 X_{CO_2} 分布如图 10 所示。图 10(a) 中电解堆在 6.0 V 电压下, 阴极气体通道内的 X_{CO_2} 从入口 0.400 至出口逐渐下降至 0.343, 阴极靠近入口侧 X_{CO_2} 降至 0.336, 阴极靠近出口侧 X_{CO_2} 进一步降至 0.330。图 10(b) 中电解堆在 6.6 V 电压下, 阴极气体通道内的 X_{CO_2} 从入口 0.400 至出口逐渐下降至 0.324, 阴极靠近入口侧 X_{CO_2} 降至 0.340, 阴极靠近出口侧 X_{CO_2} 进一步降至 0.305。图 10(c) 中电解堆在 7.2 V 电压下, 阴极气体通道内的 X_{CO_2} 从入口 0.400 至出口逐渐下降至 0.283, 阴极靠近入口侧 X_{CO_2} 降至 0.347, 阴极靠近出口侧 X_{CO_2} 进一步降至 0.248。图 10(d) 中电解堆在 7.8 V 电压下, 阴极气体通道内的 X_{CO_2} 从入口 0.400 至出口逐渐下降至 0.216, 阴极靠近入口侧 X_{CO_2} 降至 0.317, 阴极靠近出口侧 X_{CO_2} 进一步降至 0.143。

不同电压下电解堆 X_{CO} 分布如图 11 所示。图 11

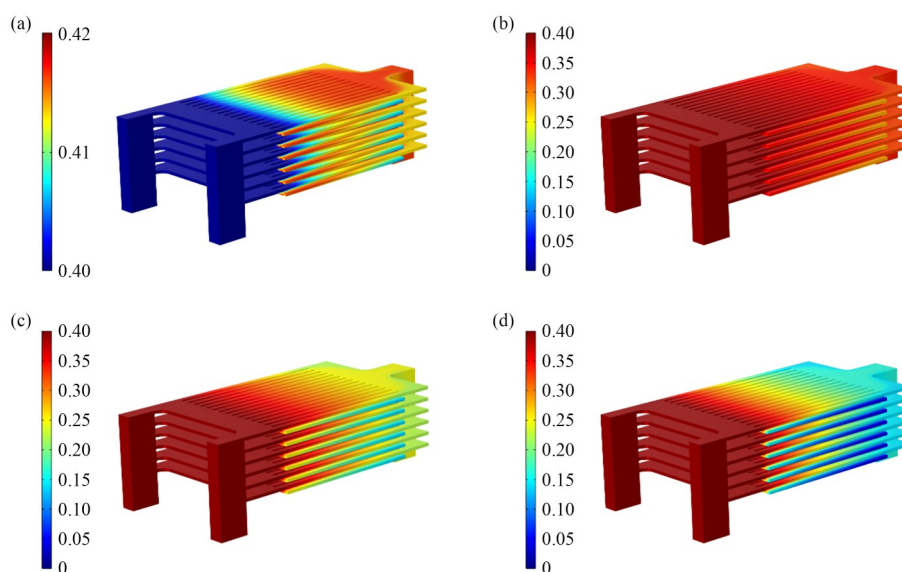


图8 不同电压情况下电解堆 $X_{\text{H}_2\text{O}}$ 分布(彩图见网络版) (a) 6.00 V, (b) 6.60 V, (c) 7.20 V, (d) 7.80 V

Fig.8 Distribution of H_2O mole fraction in the electrolysis stack under different voltages (color online) (a) 6.00 V, (b) 6.60 V, (c) 7.20 V, (d) 7.80 V

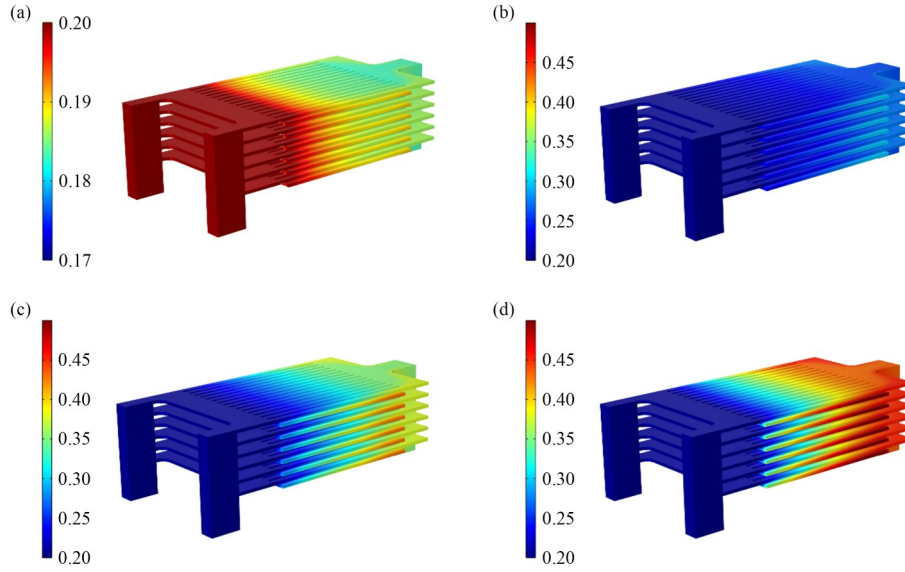


图9 不同电压情况下电解堆 X_{H_2} 分布(彩图见网络版) (a) 6.00 V, (b) 6.60 V, (c) 7.20 V, (d) 7.80 V
Fig.9 Distribution of H_2 mole fraction in the electrolysis stack under different voltages (color online)
 (a) 6.00 V, (b) 6.60 V, (c) 7.20 V, (d) 7.80 V

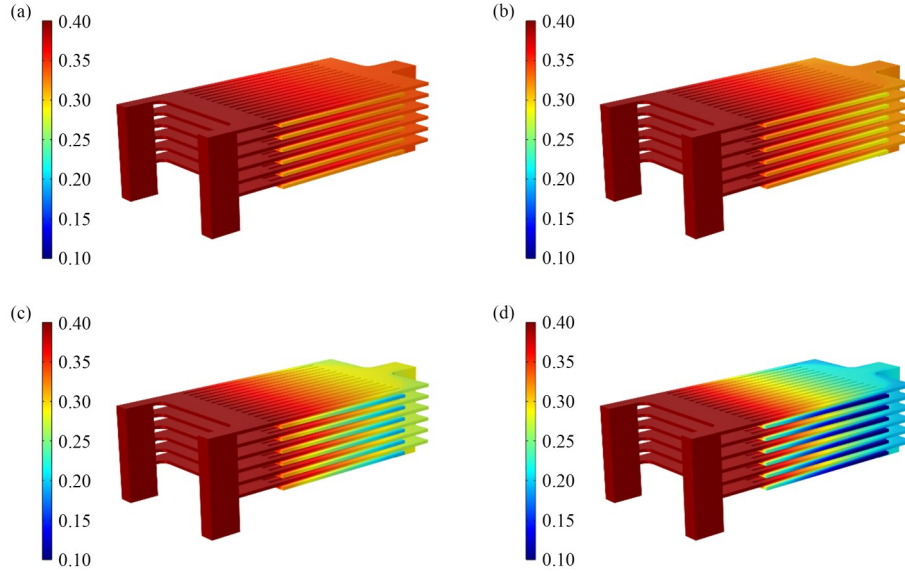


图10 不同电压情况下电解堆 X_{CO_2} 分布(彩图见网络版) (a) 6.00 V, (b) 6.60 V, (c) 7.20 V, (d) 7.80 V
Fig.10 Distribution of CO_2 mole fraction in the electrolysis stack under different voltages (color online)
 (a) 6.00 V, (b) 6.60 V, (c) 7.20 V, (d) 7.80 V

(a)中电解堆在6.0 V电压下,阴极气体流道内的 X_{CO} 从入口0至出口逐渐升高至0.056 9,阴极靠近入口侧 X_{CO} 升至0.049 1,阴极靠近出口侧 X_{CO} 进一步升至0.072 3。图11(b)中电解堆在6.6 V电压下,阴极气体流道内的 X_{CO} 从入口0至出口逐渐升高至0.076 0,阴极靠近入口侧 X_{CO} 升至0.056 8,阴极靠近出口侧 X_{CO} 进一步升至0.109。图11(c)中电解堆在7.2 V电压下,阴极气体流道内的 X_{CO} 从入口0至出口逐渐升高至0.117,阴极靠近入口侧 X_{CO} 升至0.079 2,阴极

靠近出口侧 X_{CO} 进一步升至0.184。图11(d)中电解堆在7.8 V电压下,阴极气体流道内的 X_{CO} 从入口0至出口逐渐升高至0.185,阴极靠近入口侧 X_{CO} 升至0.131,阴极靠近出口侧 X_{CO} 进一步升至0.299。

2.4 温度场分布

不同电压情况下电解堆温度分布如图12所示。图12(a)中在6.0 V电压下,电解堆平均温度665 °C,较气体进口温度平均下降35 °C,电解堆内部最大温差4 °C,电解堆靠近阴极侧入口的中下部温度较低,

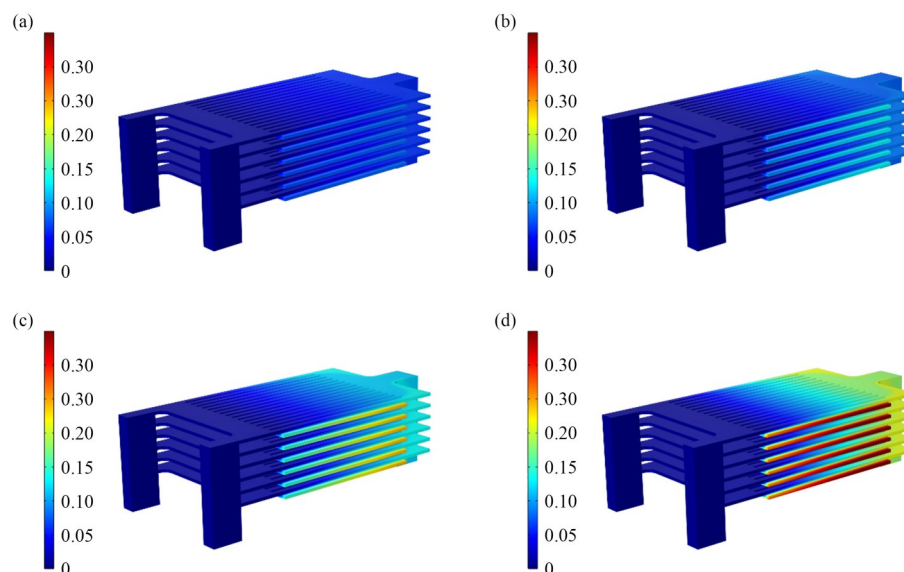


图 11 不同电压情况下电解堆 X_{CO} 分布(彩图见网络版)
 Fig.11 Distribution of CO mole fraction in the electrolysis stack under different voltages (color online)
 (a) 6.00 V, (b) 6.60 V, (c) 7.20 V, (d) 7.80 V

电解堆靠近阴极侧入口顶部和电解堆靠近阴极侧出口底部温度较高。图 12(b)中在 6.6 V 电压下,电解堆平均温度 639 °C,较气体进口温度平均下降 61 °C,电解堆内部最大温差 5 °C,温度分布规律与 6.0 V 接近。图 12(c)中在 7.2 V 电压下,电解堆平均温度 631 °C,较气体进口温度平均下降 69 °C,电解堆内部最大温差 5 °C,温度分布规律与 6.0 V 接近。图 12(d)中在 7.8 V 电压下,电解堆平均温度 657 °C,

较气体进口温度平均下降 43 °C,电解堆内部最大温差 3 °C,电解堆中下部温度较低,电解堆靠近阴极侧入口顶部温度较高。电解堆在 6.0 V、6.6 V、7.2 V 和 7.8 V 电压下的阴极侧出口平均温度分别为 667 °C、641 °C、632 °C 和 657 °C。电解堆各层电池在不同电压下的平均温度如表 2 所示,表中第 1 层为最顶层,第 6 层为最底层。

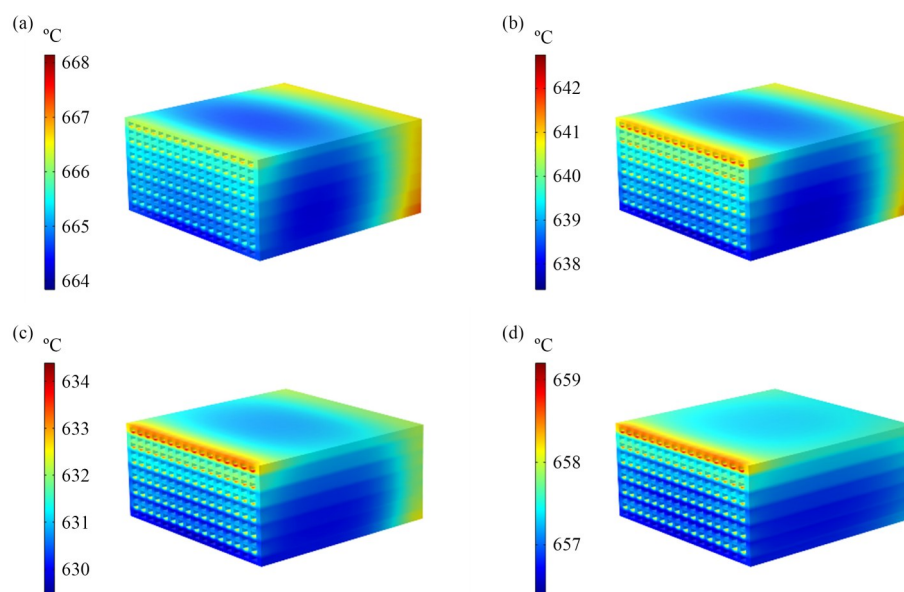


图 12 不同电压情况下电解堆温度分布(彩图见网络版)
 Fig. 12 Temperature distribution in the electrolysis stack under different voltages (color online)
 (a) 6.00 V, (b) 6.60 V, (c) 7.20 V, (d) 7.80 V

表2 电解堆各层电池在不同电压下的平均温度(°C)
Table 2 Average temperature of each layer of cell at different voltages (°C)

电堆电压 Stack voltage / V	第1层电池 Layer 1	第2层电池 Layer 2	第3层电池 Layer 3	第4层电池 Layer 4	第5层电池 Layer 5	第6层电池 Layer 6
6.00	665.12	664.92	664.80	664.76	664.80	664.92
6.60	639.01	638.68	638.47	638.38	638.40	638.53
7.20	630.98	630.60	630.36	630.24	630.23	630.35
7.80	657.24	656.97	656.79	656.69	656.68	656.75

3 模拟数据质量控制和评估

网格模型的网格数量为328 958,网格数量合理,可以获得关键物理场梯度的同时具备较好的计算效率。经网格无关性验证,当网格数量加密至413 182时,电堆的电流密度误差控制在1%,表明所选的网格具有较好的网格无关性。网格模型的平均单元质量为0.970 7,具有非常高的单元质量,网格畸变小且计算稳定性好。数值模型预测结果与试验结果接近,数值模型具有较好的准确性。数值模拟的电化学场计算误差为 5.8×10^{-6} ,温度场计算误差为 6.1×10^{-5} ,阴极侧流动场计算误差为 2.8×10^{-4} ,阴极侧物质场计算误差为 7.2×10^{-5} ,空气侧流场计算误差为 1.2×10^{-5} ,空气侧物质场计算误差为 4.6×10^{-5} 。数值模拟结果整体具有高精度的收敛性。

4 模拟数据价值

本文获得了6片电池组成的固体氧化物电解堆在6.0~7.8 V电压和700 °C温度条件下共电解制合成气过程中的物理场分布数据,包括电化学性能、流场、物质场和温度场。电解堆的数据结果可为优化设计高可靠性共电解堆,提升电解堆内的流热均匀性提供数据支撑;可为探究共电解堆失效损伤机理,寻找碳沉积位置提供数据支撑;可为高温共电解制合成气系统稳定运行,制定运行策略提供数据支撑。

作者贡献声明 崔天成主要负责论文构思、写作初稿;熊威主要负责数据处理;李泽明参与写作初稿;孙亚参与文献调研、写作编辑;李智参与写作、编辑;肖国萍主要负责获取资助、指导、写作审核。

参考文献

- 1 Aresta M, Dibenedetto A, Angelini A. Catalysis for the valorization of exhaust carbon: from CO₂ to chemicals, materials, and fuels. technological use of CO₂[J]. Chemical Reviews, 2014, **114**(3): 1709 – 1742.
- 2 Kondratenko E V, Mul G, Baltrusaitis J, *et al.* Status and perspectives of CO₂ conversion into fuels and chemicals by catalytic, photocatalytic and electrocatalytic processes

[J]. Energy & Environmental Science, 2013, **6**(11): 3112 – 3135.

- 3 Qiao J L, Liu Y Y, Hong F, *et al.* A review of catalysts for the electroreduction of carbon dioxide to produce low-carbon fuels[J]. Chemical Society Reviews, 2014, **43**(2): 631 – 675.
- 4 Ruan S P, Jiang Y C, Wang A X, *et al.* Carbon sequestration pathways in microorganisms: Advances, strategies, and applications[J]. Engineering Microbiology, 2025, **5**(2): 100196. DOI: 10.1016/j.engmic.2025.100196.
- 5 Cui T C, Zhang L G, Yan H J, *et al.* Transient thermomechanical response of an electrolyte supported planar solid oxide electrolysis cell under dynamic loading conditions[J]. Energy and Ai, 2025, **21**: 100590. DOI: 10.1016/j.egyai.2025.100590.
- 6 Sun Y, Zhang L G, Fan H P, *et al.* Influence of cell aspect-ratio on thermal and mechanical stability of solid oxide electrolysis cells[J]. Sustainable Energy Technologies and Assessments, 2025, **84**: 104689. DOI: 10.1016/j.seta.2025.104689.
- 7 侯权, 关成志, 肖国萍, 等. 固体氧化物电解池尺寸对其性能的影响[J]. 核技术, 2019, **42**(3): 030501. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2019.hjs.42.030501.
HOU Quan, GUAN Chengzhi, XIAO Guoping, *et al.* Effect of size on the electrolytic performance of solid oxide electrolysis cell[J]. Nuclear Techniques, 2019, **42** (3): 030501. DOI: 10.11889/j. 0253-3219.2019. hjs. 42. 030501.
- 8 夏梓汀, 张宇轩, 王建强, 等. 用于可逆固体氧化物燃料电池的新型B位高熵空气电极材料[J]. 核技术, 2025, **48** (6): 060009. DOI: 10.11889/j. 0253-3219.2025. hjs. 48. 250078. CSTR: 32193.14. hjs. CN31-1342/TL. 2025.48. 250078.
XIA Ziting, ZHANG Yuxuan, WANG Jianqiang, *et al.* Novel B-site high-entropy air electrode material for reversible solid oxide fuel cells[J]. Nuclear Techniques, 2025, **48**(6): 060009. DOI: 10.11889/j. 0253-3219.2025. hjs.48.250078. CSTR: 32193.14.hjs.CN31-1342/TL.2025.

- 48.250078.
- 9 Luo Y, Shi Y X, Chen Y B, *et al.* Pressurized tubular solid oxide $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ coelectrolysis cell for direct power-to-methane[J]. *AIChE Journal*, 2020, **66**(5): e16896. DOI: 10.1002/aic.16896.
- 10 Ni M. 2D thermal modeling of a solid oxide electrolyzer cell (SOEC) for syngas production by $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ co-electrolysis[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2012, **37**(8): 6389 – 6399. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2012.01.072.
- 11 Liang J J, Liu Y D, Zhao Y, *et al.* Experiments and modeling of solid oxide co-electrolysis: Occurrence of CO_2 electrolysis and safe operating conditions[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2024, **497**: 154647. DOI: 10.1016/j.ccej.2024.154647.
- 12 Ji C Z, Li R H, Deng K, *et al.* 3D multiphysics SOEC modeling and parametric analysis for syngas production by co-electrolysis of H_2O and CO_2 [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2026, **199**: 152497. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2025.152497.
- 13 Chen Y B, Luo Y, Shi Y X, *et al.* Theoretical modeling of a pressurized tubular reversible solid oxide cell for methane production by co-electrolysis[J]. *Applied Energy*, 2020, **268**: 114927. DOI: 10.1016/j.apenergy.2020.114927.
- 14 Tu Y C, Zhang Z G, Lin H X, *et al.* Numerical investigation of a novel design for an elliptical channel solid oxide electrolysis cell for $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ co-electrolysis [J]. *Fuel*, 2025, **385**: 134095. DOI: 10.1016/j.fuel.2024.134095.
- 15 Cheng C L, Ding W, Shen J F, *et al.* Multi-physics coupling simulation of $\text{H}_2\text{O} - \text{CO}_2$ co-electrolysis using flat tubular solid oxide electrolysis cells[J]. *Processes*, 2025, **13**(10): 3192. DOI: 10.3390/pr13103192.
- 16 Zeng Y, Shi R Y, Zhang H W, *et al.* Transient characterization of the mode switching process in the reversible solid oxide cell stack[J]. *Energy*, 2024, **304**: 132198. DOI: 10.1016/j.energy.2024.132198.
- 17 Banerjee A, Wang Y, Diercks J, *et al.* Hierarchical modeling of solid oxide cells and stacks producing syngas via $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ co-electrolysis for industrial applications[J]. *Applied Energy*, 2018, **230**: 996 – 1013. DOI: 10.1016/j.apenergy.2018.08.122.
- 18 Li W T, Cui T C, Sun Y, *et al.* Temperature equalization design and performance optimization of embedded high-conductivity thermal bridges in direct ammonia solid oxide fuel cells[J]. *Energy & Fuels*, 2026, **40**(21): 11534 – 11550. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.6c00796.
- 19 Jiang C Y, Gu Y C, Guan W B, *et al.* 3D thermo-electro-chemo-mechanical coupled modeling of solid oxide fuel cell with double-sided cathodes[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020, **45**(1): 904 – 915. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2019.10.139.
- 20 Pianko-Oprych P, Zinko T, Jaworski Z. A numerical investigation of the thermal stresses of a planar solid oxide fuel cell[J]. *Materials*, 2016, **9**(10): 814. DOI: 10.3390/ma9100814.
- 21 Wang C, Yang J J, Huang W, *et al.* Numerical simulation and analysis of thermal stress distributions for a planar solid oxide fuel cell stack with external manifold structure [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2018, **43** (45): 20900 – 20910. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2018.08.076.